Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения
Российской академии наук

МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
Перспективные материалы с иерархической структурой для новых технологий и надежных конструкций
9 - 13 октября 2017 года
Томск, Россия

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

Томск – 2017

материала разных размеров, а также на макроскопическую диаграмму деформирования.

Полученные результаты позволяют оценить влияние структуры пористой керамики на ее прочностные и функциональные свойства.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, проект 23.2.3.

Литература

1. Wilkins M.L. Computer Simulation of Dynamic Phenomena. – Berlin, Heidelberg: Springer Verlag, 1999. – 246p.
2. Смолин И.Ю., Еремин М.О., Макаров П.В., Буякова С.П., Кульков С.Н., Евтушенко Е.П. Численное моделирование механического поведения модельных хрупких пористых материалов на мезоуровне// Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. – 2013. – № 5(25). – С. 78–90.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ВЫБРАННЫХ МЕЖАТОМНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ И РАЗМЕРА СТРУКТУР ПРИ МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОМ МОДЕЛИРОВАНИИ СКОЛЬЖЕНИЯ АМОРФНОГО КРЕМНЕЗЁМА

[1,2]Дмитриев А.И., [1,2]Никонов А.Ю., [3]W. Oesterle
[1]Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия,
[2]Томский государственный университет, Томск, Россия,
[3]Federal Institute for Materials Research and Testing, Berlin, Germany
dmitr@ispms.ru

В работе [1] авторами было проведено моделирование трения для пленок аморфного диоксида кремния на основе метода молекулярной динамики. При условии, что аморфная структура остается стабильной во время сильных сдвиговых деформаций, возникающих во время скольжения, такое моделирование скольжения можно осуществить при любой температуре. Тем не менее, в свободной литературе приводятся лишь незначительные результаты. Кроме упомянутой работы [1] с аморфным кремнезёмом, слои аморфного углерода, полученные из алмаза, были смоделированы в работе [2], а пленки аморфного полифосфата рассматривались в [3]. С другой стороны в недавних работах [4, 5] было проведено исследование деформационного отклика наноразмерных объектов, состоящих из аморфного кремнезёма. В работе [4] приводятся результаты молекулярно-динамического теста на растяжение, в то время как работа [5] посвящена in-situ наномеханическому испытанию нановолокон и наночастиц кремнезёма в рамках электронной микроскопии. Было показано, что тщательный подбор параметров модели позволяет правильно предсказывать прочностные и деформационные свойства таких нанообъектов.

Хорошо известно, что квантово-механические ab-initio расчеты могут быть в принципе использованы для описания структуры практически любого материала. Тем не менее, в работе [6] показано, что даже довольно простые парные потенциалы, подобные тем, которые развили van Beest, Kramer и van Santen в [7], могут быть использованы для воспроизводства многих свойств кремнезема удовлетворительным образом. Это побудило нас еще раз пересмотреть наши предыдущие результаты по моделированию трения, выполненные с использованием классического потенциала Tersoff [1, 8] и рассмотреть один из недавно разработанных новых потенциалов ReaxFF [9]. Настоящая работа посвящена сопоставлению результатов моделирования тестов на растяжения и сдвиг для образцов аморфного кремнезёма с использованием упомянутых выше потенциалов [8] и [9]. Результаты исследований показали зависимость механических свойств образцов аморфного кремнезёма от используемой методики расчета межатомного взаимодействия.

Литература

1. A.I. Dmitriev, A.Y. Nikinov, W. Österle. Lubricants 4, 24 (2016).
2. L. Pastewka, S. Moser, M. Moseler. Tribology Letters 39 (2010) 49.
3. Martin JM, Onodera T, Minfray C, Dassenoy F, Miyamoto A. Faraday Discussions, 156 (2012) 311-23.
4. Zhang C, Duan F, Liu Q. Computational Materials Science 99 (2015) 138.
5. Luo J, Wang J, Bitzek E, Huang JY, Zheng H, Tong L, Yang Q, Li J, Mao SX. Nano Letters 16, 1 (2016) 105.
6. Carre A, Ispas S, Horbach J, Kob W. Computational Materials Science 124 (2016) 323.
7. van Beest BWH, Kramer GJ, van Santen RA. Physical Review Letters 64 (1990) 1955.
8. Tersoff J. Physical Review 37B (1988) 6991.
9. van Duin A, Strachan A, Stewman S, Zhang Q, Xu X, Goddard WA. Journal of Physical Chemistry A107 (2003) 3803

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНО-РАСЧЕТНОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ДИССИПАТИВНЫХ СВОЙСТВ ОБРАЗЦОВ УГЛЕПЛАСТИКОВЫХ МАТЕРИАЛОВ ПО РЕЗОНАНСНОМУ ПИКУ ПРИ РАЗНЫХ УРОВНЯХ ВОЗДЕЙСТВИЯ

[1,2]Казакова О.И., [1,3]Смолин И.Ю., [1,2]Безмозгий И.М.
[1]Томский государственный университет, Томск, Россия,
[2]ПАО "Ракетно-космическая корпорация "Энергия" имени С.П. Королёва", Королёв, Россия,
[3]Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия
okazakova.rsk@gmail.com

Теоретические и экспериментальные исследования указывают на влияние на коэффициент внутреннего трения значений амплитуд колебаний, которые в свою очередь зависят от уровней входного воздействия. В тоже время современные программные комплексы численного моделирования, такие как